

ИНТЕРВАЛЬНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ ОДНОТИПНЫХ АНАЛИТОВ

Вершинин В.И.

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
644077, Омск, проспект Мира, 55а, e-mail: vyvershinin@yandex.ru*

В анализе нефтепродуктов, пищевых продуктов и природных вод суммарные содержания (c_{Σ}) однотипных аналитов обычно находят в пересчете на стандартное вещество $X_{ст}$. Аналиты (X_i) не разделяют, а измеряют их обобщенный сигнал A_{Σ} . Затем вычисляют интегральный показатель (ИП) по формуле $c^* = A_{\Sigma}/K_{cm}$, где K_{cm} – чувствительность определения $X_{ст}$, а c^* – численное значение ИП, которое и считают равным искомому c_{Σ} . Примеры ИП: фенольный индекс, обобщенная антиоксидантная активность, общий белок. Результаты измерения ИП хорошо воспроизводимы, но выражение c_{Σ} в виде ИП метрологически некорректно, результаты анализа содержат неопределенность типа В. Иногда c^* и c_{Σ} отличаются в несколько раз. Основная причина этого – различия коэффициентов чувствительности (K_i) при определении разных X_i , т. е. внутригрупповая селективность сигналов.

В докладе будет представлен алгоритм интервального оценивания c_{Σ} , не требующий пересчета на $X_{ст}$. Границы интервала вычисляют с учетом минимального и максимального значений K_i при определении аналитов данной группы по выбранной методике. Величина Δc – ширина интервала возможных значений c_{Σ} – характеризует систематическую составляющую неопределенности, она не зависит от выбора $X_{ст}$ и состава смеси X_i в единичной пробе. Используемая модель, расчетные формулы и границы их применимости описаны в статье¹. Действительное значение c_{Σ} всегда попадает в границы найденного интервала, но Δc значительно превышает ширину доверительных интервалов, вычисляемых по алгоритмам Стьюдента или Лапласа. Правильность оценок c_{Σ} подтверждена анализом разных модельных смесей с применением разных способов измерения сигналов². В докладе приведены найденные спектрометрическими методами интервальные оценки содержания антиоксидантов в пищевых продуктах и фенолов в сточных водах. Будут обсуждены способы повышения точности интервальных оценок.

Литература

1. Vershinin V.I., Isachenko N.V., Brilenok N.S. J. Anal. Chem., 2016, 71, 351.
2. Вершинин В.И. Определение суммарного содержания однотипных веществ (теория интегральных показателей) Омск: ОмГУ. 2017. 288с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-43-550479.